

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФГБОУ ВО «БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ
КАФЕДРА ПРИКЛАДНОЙ ФИЗИКИ

Утверждено:
на заседании кафедры
протокол «14» июня 2018 г. № 11

Согласовано:
Председатель УМК ФТИ

Зав. кафедрой  / Ковалева Л.А.



/ Балапанов М.Х.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

дисциплина

Вычислительная физика

(наименование дисциплины)

Б1.В.1.01.02 вариативная часть, обязательная дисциплина

(цикл дисциплины и его часть (базовая, вариативная, дисциплина по выбору))

программа бакалавриата

Направление подготовки (специальность)

03.03.01 Прикладные математика и физика

(указывается код и наименование направления подготовки (специальности))

Направленность (профиль) подготовки


Моделирование физических процессов и технологий

(указывается наименование направленности (профиля) подготовки)

Квалификация

Бакалавр

(указывается квалификация)

Разработчик (составитель) <u>доцент, кандидат физико-математических наук,</u> <u>доцент</u> (должность, ученая степень, ученое звание)	 / Киреев В.Н. (подпись, Фамилия И.О.)
---	---



/ Киреев В.Н.
(подпись, Фамилия И.О.)

Для приема: 2018 г.

Уфа 2018 г.

Составитель: доцент кафедры прикладной физики, к.ф.-м.н., доцент Киреев Виктор Николаевич

Рабочая программа дисциплины утверждена на заседании кафедры протокол от «14» июня 2018 г.
№ 11

Заведующий кафедрой



_____ / Ковалева Л.А.

Список документов и материалов

1 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы	4
2 Цель и место дисциплины в структуре образовательной программы.....	6
3 Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся).....	6
4 Фонд оценочных средств по дисциплине	7
4.1 Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы. Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания	7
4.2 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций	9
4.3 Рейтинг-план дисциплины	18
5 Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины.....	19
5.1 Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины	19
5.2 Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины.....	20
6 Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.....	21

1 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

В результате освоения образовательной программы обучающийся должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине:

- ОПК-2** – способностью применять теорию и методы математики для построения качественных и количественных моделей объектов и процессов в естественнонаучной сфере;
- ОПК-4** – способностью применять полученные знания для анализа систем, процессов и методов;
- ПК-4** – способностью критически оценивать применимость применяемых методик и методов.

Результаты обучения		Формируемая компетенция (с указанием кода)	Примечание
Знания	1. Система понятий в области современного программирования, включающую методы проектирования и анализа информационных моделей реальных объектов и структур	ОПК-2	
	2. Основные численные методы решения физических задач и обработки результатов измерений	ОПК-4	
	3. Методология, методы и приемы проведения вычислительных экспериментов	ПК-4	
Умения	1. Анализ постановки задачи, выбор оптимальных средств и численных методов решения задачи, реализация всех этапов решения задачи на компьютере, анализ и тестирование полученных результатов	ОПК-2	
	2. Описание физических явлений с применением известных физических моделей и построение математических модели для описания простейших физических явлений	ОПК-4	
	3. Интерпретировать и анализировать результаты расчетов и вычислительных экспериментов	ПК-4	
Владения (навыки / опыт деятельности)	1. Численные расчеты физических величин при решении физических задач и обработке экспериментальных результатов	ОПК-2	
	2. Представление физической информации различными способами (в вербальной, знаковой, аналитической, математической, графической, схемотехнической, образной, алгоритмической формах)	ОПК-4	

	3. Способы выбора адекватных численных методов и оптимальных способов их реализации в виде компьютерных кодов с учетом особенностей решаемой задачи	ПК-4	
--	---	-------------	--

2 Цель и место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «*Вычислительная физика*» относится к *вариативной* части.

Дисциплина изучается на 2 курсе в 3 семестрах.

Целями освоения дисциплины «Вычислительная физика» является:

- ознакомление обучающихся с задачами моделирования физических процессов и явлений;
- ознакомление обучающихся с основными вычислительными методами, применяемыми при решении физических задач и обработке данных эксперимента, способами их оптимальной реализации на компьютере, оценками погрешности результата проводимых расчетов;
- формирование у обучающихся практических навыков программирования основных математических алгоритмов, применяемых при моделировании физических явлений;

Задачами освоения дисциплины является изучение теоретических основ численных методов, формирование у обучающихся умений и привитие им навыков практического использования ЭВМ для решения прикладных физических задач.

Для освоения дисциплины «Вычислительная физика» необходимы компетенции, сформированные в рамках изучения следующих дисциплин:

- Математический анализ
- Аналитическая геометрия
- Линейная алгебра
- Программирование

Знания и умения, накопленные при изучении дисциплины «Численные методы и вычислительная математика», используются при выполнении выпускной квалификационной работы.

3 Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся)

Содержание рабочей программы представлено в Приложении № 1.

4 Фонд оценочных средств по дисциплине

4.1 Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы. Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания

ОПК-2 – Способность применять теорию и методы математики для построения качественных и количественных моделей объектов и процессов в естественнонаучной сфере

Этап (уровень) освоения компетенции	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения	
		Не зачтено	Зачтено
Первый этап (уровень)	Знать систему понятий в области современного программирования, включающую методы проектирования и анализа информационных моделей реальных объектов и структур	Не знает или знает частично систему понятий в области современного программирования, включающую методы проектирования и анализа информационных моделей реальных объектов и структур	Знает систему понятий в области современного программирования, включающую методы проектирования и анализа информационных моделей реальных объектов и структур
Второй этап (уровень)	Уметь анализировать постановки задачи, выбирать оптимальные средства и численные методы решения задачи, реализовывать все этапы решения задачи на компьютере, анализировать и тестировать полученные результаты	Не умеет анализировать постановки задачи, выбирать оптимальные средства и численные методы решения задачи, реализовывать все этапы решения задачи на компьютере, анализировать и тестировать полученные результаты	Умеет анализировать постановки задачи, выбирать оптимальные средства и численные методы решения задачи, реализовывать все этапы решения задачи на компьютере, анализировать и тестировать полученные результаты
Третий этап (уровень)	Владеть навыками проведения численных расчетов физических величин при решении физических задач и обработке экспериментальных результатов	Удовлетворительно владеет навыками проведения численных расчетов физических величин при решении физических задач и обработке экспериментальных результатов	Хорошо владеет навыками проведения численных расчетов физических величин при решении физических задач и обработке экспериментальных результатов

ОПК-4 – Способность применять полученные знания для анализа систем, процессов и методов

Этап (уровень) освоения компетенции	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения	
		Не зачтено	Зачтено
Первый этап (уровень)	Знать основные численные методы решения физических задач и обработки результатов измерений	Не знает или знает частично основные численные методы решения физических задач и обработки результатов измерений	Знает основные численные методы решения физических задач и обработки результатов измерений
Второй этап (уровень)	Уметь описывать физические явления с применением известных физических моделей и строить математические	Не умеет описывать физические явления с применением известных физических моделей и строить математические	Умеет описывать физические явления с применением известных физических моделей и строить математические модели для

	модели для описания простейших физических явлений	модели для описания простейших физических явлений	описания простейших физических явлений
Третий этап (уровень)	Владеть навыками представления физической информации различными способами (в вербальной, знаковой, аналитической, математической, графической, схемотехнической, образной, алгоритмической формах)	Удовлетворительно владеет навыками представления физической информации различными способами (в вербальной, знаковой, аналитической, математической, графической, схемотехнической, образной, алгоритмической формах)	Хорошо владеет навыками представления физической информации различными способами (в вербальной, знаковой, аналитической, математической, графической, схемотехнической, образной, алгоритмической формах)

ПК-4 – способность критически оценивать применимость применяемых методик и методов.

этап (уровень) освоения компетенции	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения	
		Не зачтено	Зачтено
Первый этап (уровень)	Знать методологию, методы и приемы проведения вычислительных экспериментов	Не знает или знает частично методологию, методы и приемы проведения вычислительных экспериментов	Знает методологию, методы и приемы проведения вычислительных экспериментов
Второй этап (уровень)	Уметь интерпретировать и анализировать результаты расчетов и вычислительных экспериментов	Не умеет интерпретировать и анализировать результаты расчетов и вычислительных экспериментов	Умеет интерпретировать и анализировать результаты расчетов и вычислительных экспериментов
Третий этап (уровень)	Владеть способами выбора адекватных численных методов и оптимальных способов их реализации в виде компьютерных кодов с учетом особенностей решаемой задачи	Удовлетворительно владеет способами выбора адекватных численных методов и оптимальных способов их реализации в виде компьютерных кодов с учетом особенностей решаемой задачи	Хорошо владеет способами выбора адекватных численных методов и оптимальных способов их реализации в виде компьютерных кодов с учетом особенностей решаемой задачи

Показатели сформированности компетенции:

Критериями оценивания являются баллы, которые выставляются преподавателем за виды деятельности (оценочные средства) по итогам изучения модулей (разделов дисциплины), перечисленных в рейтинг-плане дисциплины (для зачета: текущий контроль – максимум 50 баллов; рубежный контроль – максимум 50 баллов, поощрительные баллы – максимум 10).

Шкала оценивания для зачета:

зачтено – от 60 до 110 рейтинговых баллов (включая 10 поощрительных баллов),
не зачтено – от 0 до 59 рейтинговых баллов).

4.2 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций

Этапы освоения	Результаты обучения	Компетенция	Оценочные средства
1-й этап Знания	1. Основные методы численного решения обыкновенных дифференциальных уравнений и уравнений в частных производных	ОПК-2	Лабораторные работы Контрольные работы
	2. Методы и приемы применения пакета MATLAB для численного решения задач в своей предметной области	ОПК-4	
	3. Методология, методы и приемы проведения вычислительных экспериментов	ПК-4	
2-й этап Умения	1. Применять вычислительные алгоритмы математики для решения дифференциальных уравнений математических моделей объектов и процессов	ОПК-2	Лабораторные работы Контрольные работы
	2. Программно реализовывать алгоритмы вычислительной математики в пакете MATLAB	ОПК-4	
	3. Интерпретировать и анализировать результаты расчетов и вычислительных экспериментов	ПК-4	
3-й этап Владеть навыками	1. Современными методами вычислительной математики, методами построения математических моделей для задач в естественнонаучной сфере	ОПК-2	Лабораторные работы Контрольные работы
	2. Навыки использования современных численных методов	ОПК-4	
	3. Способы выбора адекватных численных методов и оптимальных способов их реализации в виде компьютерных кодов с учетом особенностей решаемой задачи	ПК-4	

Примерные вопросы для письменного ответа

1. Conservation Laws and Physics
2. Significant Figures. Accuracy and Precision
3. Error Definition. Round-Off Errors
4. The Taylor Series. Error Propagation
5. Total Numerical Error. Blunders, Formulation Errors and Data Uncertainty
6. The Bisection Method.
7. The False Position Method
8. Incremental Search and Determining Initial Guesses
9. Simple Fixed-Point Iteration
10. The Newton-Raphson Method.
11. The Secant Method
12. Computing with Polynomials. Conventional Methods
13. Computing with Polynomials. Muller's Method. Bairstow's Method
14. Gauss Elimination
15. Decomposition and Matrix Inversion
16. Special Matrices and Gauss-Seidel
17. One-Dimensional Unconstrained Optimization. Golden-Section Search
18. One-Dimensional Unconstrained Optimization. Quadratic Interpolation
19. One-Dimensional Unconstrained Optimization. Newton's Method
20. Multidimensional Unconstrained Optimization. Direct Methods
21. Multidimensional Unconstrained Optimization. Gradient Methods
22. Constrained Optimization. Linear programming
23. Nonlinear Constrained Optimization.
24. Linear Regression. Polynomial Regression
25. Multiple Linear Regression
26. General Linear Least Squares
27. Newton's Divided-Difference Interpolating Polynomials
28. Lagrange Interpolating Polynomials
29. Inverse Interpolation
30. Curve Fitting with Sinusoidal Functions. Continuous Fourier Series
31. Numerical Integration. The Trapezoidal Rule. Simpson's Rules
32. Numerical Integration. Newton-Cotes Algorithm for Equation
33. Numerical Integration. Romberg Integration
34. Numerical Integration. Gauss Quadrature
35. Numerical Differentiation. High-accuracy Differentiation Formulas
36. Numerical Differentiation. Richardson Extrapolation

Примеры типовых задач, предлагаемых на лабораторных занятиях и контрольных работах

Тема 1. Errors Analysis

- Convert the following base-2 numbers to base-10: (a) 101101, (b) 101.101, and (c) 0.01101.
- Compose a program to determine your computer's machine epsilon.
- Write a program to determine the smallest number, x_{\min} , used on the computer you will be employing along with this course. Note that your computer will be unable to reliably distinguish between zero and a quantity that is smaller than this number.
- The infinite series

$$f(n) = \sum_{i=1}^n i^4$$

converges on a value of $f(n) = \pi^4/90$ as n approaches infinity. Write a program in single precision to calculate $f(n)$ for $n = 10000$ by computing the sum from $i = 1$ to 10000. Then repeat the calculation but in reverse order - that is, from $i = 10000$ to 1 using increments of -1. In each case, compute the true percent relative error. Explain the results.

- Evaluate e^{-5} using two approaches

$$e^{-x} = 1 - x + \frac{x^2}{2} - \frac{x^3}{3!} + \dots$$

And

$$e^{-x} = \frac{1}{e^x} = \frac{1}{1 + x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3!} + \dots}$$

and compare with the true value of $6,737947 \cdot 10^3$. Use 20 terms to evaluate each series and compute true and approximate relative errors as terms are added.

- The derivative of $f(x) = 1/(1 - 3x^2)^2$ is given by

$$\frac{6x}{(1 - 3x^2)^2}$$

Do you expect to have difficulties evaluating this function at $x = 0,577$? Try it using 3- and 4-digit arithmetic with chopping.

- (a) Evaluate the polynomial

$$y = x^3 - 7x^2 + 8x - 0,35$$

at $x = 1,37$. Use 3-digit arithmetic with chopping. Evaluate the percent relative error.

- Repeat (a) but express y as

$$y = ((x - 7)x + 8)x - 0,35$$

Evaluate the error and compare with part (a).

8. Calculate the random access memory (RAM) in megabytes necessary to store a multidimensional array that is $20 \times 40 \times 120$. This array is double precision, and each value requires a 64-bit word. Recall that a 64-bit word = 8 bytes and 1 kilobyte = 210 bytes. Assume that the index starts at 1.

9. Determine the number of terms necessary to approximate $\cos x$ to 8 significant figures using the Maciaurin series approximation

$$\cos x = 1 - \frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \frac{x^8}{8!} - \dots$$

Calculate the approximation using a value of $x = 0,3\pi$. Write a program to determine your result.

- Use 5-digit arithmetic with chopping to determine the roots of the following equation

$$x^2 - 5000,002x + 10$$

Compute percent relative errors for your results.

11. How can the machine epsilon be employed to formulate a stopping criterion for your programs? Provide an example.

Tema 2. Roots of Equations

1. Determine the real roots of $f(x) = -0.5x^2 + 2.5x + 4.5$:

(a) Graphically.

(b) Using the quadratic formula.

(c) Using three iterations of the bisectional method to determine the highest root. Employ initial guesses of $x_l = 5$ and $x_u = 10$. Compute the estimated error ε_a and the true error ε_t after each iteration.

2. Determine the real root of $f(x) = 5x^3 - 5x^2 + 6x - 2$:

(a) Graphically.

(b) Using bisection to locate the root. Employ initial guesses of $x_l = 0$ and $x_u = 1$ and iterate until the estimated error ε_a falls below a level of $\varepsilon_s = 10\%$.

3. Determine the real root of $f(x) = -25 + 82x - 90x^2 + 44x^3 - 8x^4 + 0.7x^5$:

(a) Graphically.

(b) Using bisection to determine the root to $\varepsilon_s = 10\%$. Employ initial guesses of $x_l = 0.5$ and $x_u = 1.0$.

(c) Perform the same computation as in (b) but use the false-position method and $\varepsilon_s = 0.2\%$.

4. (a) Determine the roots of $f(x) = -12 - 21x + 18x^2 + 2.75x^3$ graphically. In addition, determine the first root of the function with (b) bisection, and (c) false position. For (b) and (c) use initial guesses of $x_l = -1$ and $x_u = 0$, and a stopping criterion of 1%.

5. Use simple fixed-point iteration to locate the root of

$$f(x) = 2\sin(\sqrt{x}) - x$$

Use an initial guess of $x_0 = 0.5$ and iterate until $\varepsilon_a < 0.001\%$. Verify that the process is linearly convergent.

6. Determine the highest real root of

$$f(x) = 2x^3 - 11.7x^2 + 17.7x - 5$$

(a) Graphically.

(b) Fixed-point iteration method (three iterations, $x_0 = 3$). Note: Make certain that you develop a solution that converges on the root.

(c) Newton-Raphson method (three iterations, $x_0 = 3$).

(d) Secant method (three iterations, $x_{-1} = 3$, $x_0 = 4$).

(e) Modified secant method (three iterations, $x_0 = 3$, $\delta = 0.01$) Compute the approximate percent relative errors for your solutions.

7. Use (a) fixed-point iteration and (b) the Newton-Raphson method to determine a root of $f(x) = -x^2 + 1.8x + 2.5$ using $x_0 = 5$. Perform the computation until ε_a is less than $\varepsilon_s = 0.05\%$. Also perform an error check of your final answer.

8. Determine the real roots of $f(x) = -1 + 5.5x - 4x^2 + 0.5x^3$: (a) graphically and (b) using the Newton-Raphson method to within $\varepsilon_s = 0.01\%$.

9. Divide a polynomial $f(x) = x^4 - 7.5x^3 + 14.5x^2 + 3x - 20$ by the monomial factor $x - 2$. Is $x = 2$ a root?

10. Divide a polynomial $f(x) = x^5 - 5x^4 + x^3 - 6x^2 - 7x + 10$ by the monomial factor $x - 2$.

11. Use Muller's method to determine the positive real root of

(a) $f(x) = x^3 + x^2 - 3x - 5$

(b) $f(x) = x^3 - 0,5x^2 + 4x - 3$

12. Use Muller's method to determine the real and complex roots of

(a) $f(x) = x^3 - x^2 + 3x - 2$

(b) $f(x) = 2x^4 + 6x^2 + 10$

(c) $f(x) = x^4 - 2x^3 + 6x^2 - 8x + 8$

Tema 3. Linear Algebraic Equations

1. Given the equations

$$10x_1 + 2x_2 - x_3 = 27$$

$$-3x_1 - 6x_2 + 2x_3 = -61,5$$

$$-x_1 + x_2 + 5x_3 = -21,5$$

(a) Solve by naive Gauss elimination. Show all steps of the computation.

(b) Substitute your results into the original equations to check your answers.

2. Use Gauss elimination to solve:

$$8x_1 + 2x_2 - 2x_3 = -2$$

$$10x_1 + 2x_2 + 4x_3 = 4$$

$$12x_1 - 2x_2 + 2x_3 = 6$$

Employ partial pivoting and check your answers by substituting them into the original equations.

3. Given the system of equations

$$-3x_2 + 7x_3 = 2$$

$$x_1 + 2x_2 - x_3 = 3$$

$$5x_1 - 2x_2 = 2$$

(a) Compute the determinant.

(b) Use Cramer's rule to solve for the x 's.

(c) Use Gauss elimination with partial pivoting to solve for the x 's.

(d) Substitute your results back into the original equations to check your solution.

4. (a) Use naive Gauss elimination to decompose the following system

$$10x_1 + 2x_2 - x_3 = 27$$

$$-3x_1 - 6x_2 + 2x_3 = 61,5$$

$$x_1 + x_2 + 5x_3 = -21,5$$

Then, multiply the resulting [L] and [U] matrices to determine that [A] is produced, (b) Use LU decomposition to solve the system. Show all the steps in the computation, (c) Also solve the system for an alternative right-hand-side vector: $\{B\}^T = [12 \ 18 \ -6]$.

5. (a) Solve the following system of equations by LU decomposition without pivoting

$$8x_1 + 4x_2 - x_3 = 11$$

$$-2x_1 + 5x_2 + x_3 = 4$$

$$2x_1 - x_2 + 6x_3 = 7$$

(b) Determine the matrix inverse. Check your results by verifying that $[A][A]^{-1} = [I]$.

6. Solve the following system of equations using LU decomposition with partial pivoting:

$$2x_1 - 6x_2 - x_3 = -38$$

$$-3x_1 - x_2 + 7x_3 = -34$$

$$-8x_1 + x_2 - 2x_3 = -20$$

7. Determine the total flops as a function of the number of equations n for the (a) decomposition, (b) forward-substitution, and (c) back-substitution phases of the LU decomposition version of Gauss elimination.

8. Use the Gauss-Seidel method to solve the following system until the percent relative error falls below 5%

$$10x_1 + 2x_2 - x_3 = 27$$

$$-3x_1 - 6x_2 + 2x_3 = -61,5$$

$$x_1 + x_2 + 5x_3 = -21,5$$

9. Use the Gauss-Seidel method (a) without relaxation and (b) with relaxation ($\lambda = 0,95$) to solve the following system to a tolerance of 5%. If necessary, rearrange the equations to achieve convergence.

$$-3x_1 - x_2 + 12x_3 = 50$$

$$6x_1 - x_2 - x_3 = 3$$

$$6x_1 + 9x_2 + x_3 = 40$$

10. Use the Gauss-Seidel method (a) without relaxation and (b) with relaxation ($\lambda = 1,2$) to solve the following system to a tolerance of 5%. If necessary, rearrange the equations to achieve convergence.

$$2x_1 - 6x_2 - x_3 = -38$$

$$-3x_1 - x_2 + 7x_3 = -34$$

$$-8x_1 + x_2 - 2x_3 = -20$$

Tema 4. Optimization

1. Employ the following methods to find the maximum of

$$f(x) = 4x - 1,8x^2 + 1,2x^3 - 0,3x^4$$

- (a) Golden-section search ($x_l = -2$, $x_u = 4$, $e_s = 1\%$).
- (b) Quadratic interpolation ($x_0 = 1,75$, $x_1 = 2$, $x_2 = 2,5$, iterations = 4).
- (c) Newton's method ($x_0 = 3$, $e_s = 1\%$).

2. Consider the following function:

$$f(x) = -x^4 - 2x^3 - 8x^2 - 5x$$

Use analytical and graphical methods to show the function has a maximum for some value of x in the range $-2 < x < 1$.

3. Employ the following methods to find the maximum of the function

$$f(x) = -x^4 - 2x^3 - 8x^2 - 5x$$

- (a) Golden-section search ($x_l = -2$, $x_u = 1$, $e_s = 1\%$).
- (b) Quadratic interpolation ($x_0 = -2$, $x_1 = -1$, $x_2 = 1$, iterations = 4).
- (c) Newton's method ($x_0 = -1$, $e_s = 1\%$).

4. Consider the following function:

$$f(x) = 2x + \frac{3}{x}$$

Perform 10 iterations of quadratic interpolation to locate the minimum. Comment on the convergence of your results, ($x_0 = 0,1$, $x_1 = 0,5$, $x_2 = 5$)

5. Consider the following function:

$$f(x) = 3 + 6x + 5x^2 + 3x^3 + 4x^4$$

Locate the minimum by finding the root of the derivative of this function. Use bisection with initial guesses of $x_l = -2$ and $x_u = 1$.

6. Find the minimum value of

$$f(x, y) = (x - 3)^2 + (y - 2)^2$$

starting at $x = 1$ and $y = 1$, using the steepest descent method with a stopping criterion of $e_s = 1\%$. Explain your results.

7. Perform one iteration of the steepest ascent method to locate the maximum of

$$f(x, y) = 4x + 2y + x^2 - 2x^4 + 2xy - 3y^2$$

using initial guesses $x = 0$ and $y = 0$. Employ bisection to find the optimal step size in the gradient search direction.

8. Perform one iteration of the optimal gradient steepest descent method to locate the minimum of

$$f(x, y) = -8x + x^2 + 12y + 4y^2 - 2xy$$

using initial guesses $x = 0$ and $y = 0$.

9. Consider the linear programming problem:

$$\text{Maximize } f(x, y) = 1,75x + 1,25y$$

subject to

$$1,2x + 2,25y < 14$$

$$x + 1,1y < 8$$

$$2,5x + y < 9$$

$$x > 0$$

$$y > 0$$

Obtain the solution:

- Graphically.
- Using the simplex method.
- Using an appropriate package or software library (for example. Excel, MATLAB, IMSL).

Tema 5. Curve Fitting

1. Use least-squares regression to fit a straight line to

X	0	2	4	6	9	11	12	15	17	19
Y	5	6	7	6	9	8	7	10	12	12

Along with the slope and intercept, compute the standard error of the estimate and the correlation coefficient. Plot the data and the regression line. Then repeat the problem, but regress x versus y - that is, switch the variables. Interpret your results.

2. Use least-squares regression to fit a straight line to

X	6	7	11	15	17	21	23	29	29	37	39
Y	29	21	29	14	21	15	7	7	13	0	3

Along with the slope and the intercept, compute the standard error of the estimate and the correlation coefficient. Plot the data and the regression line. If someone made an additional measurement of $x = 10$, $y = 10$, would you suspect, based on a visual assessment and the standard error, that the measurement was valid or faulty? Justify your conclusion.

3. Use least-squares regression to fit a straight line to

X	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Y	1	1.5	2	3	4	5	8	10	13

(a) Along with the slope and intercept, compute the standard error of the estimate and the correlation coefficient. Plot the data and the straight line. Assess the fit.

(b) Recompute (a), *but use polynomial regression to fit a parabola to the data*. Compare the results with those of (a)

4. Fit the following data with (a) a saturation-growth-rate model, (b) a power equation, and (c) a parabola. In each case, plot the data and the equation

x	0.75	2	3	4	6	8	8.5
y	1.2	1.95	2	2.4	2.4	2.7	2.6

5. Fit the following data with the power model ($y = ax^b$). Use the resulting power equation to predict y at $x = 9$:

x	2.5	3.5	5	6	7.5	10	12.5	15	17.5	20
y	13	11	8.5	8.2	7	6.2	5.2	4.8	4.6	4.3

6. Fit an exponential model to

x	0.4	0.8	1.2	1.6	2	2.3
y	800	975	1500	1950	2900	3600

Plot the data and the equation on both standard and semi-logarithmic graph paper.

7. Given the data

x	<u>1.6</u>	<u>2</u>	<u>2.5</u>	<u>3.2</u>	<u>4</u>	<u>4.5</u>
y	2	8	14	15	8	2

(a) Calculate $f(2.8)$ using Newton's interpolating polynomials of order 1 through 3. Choose the sequence of the points for your estimates to attain the best possible accuracy.

(b) Estimate the error for each prediction.

8. Given the data

x	1	2	3	5	7	8
y	3	6	19	99	291	444

Calculate $f(4)$ using Newton's interpolating polynomials of order 1 through 4. Choose your base points to attain good accuracy. What do your results indicate regarding the order of the polynomial used to generate the data in the table?

9. Employ inverse interpolation using a cubic interpolating polynomial and bisection to determine the value of x that corresponds to $f(x) = 0.23$ for the following tabulated data:

x	2	3	4	5	6	7
y	0.5	0.3333	0.25	0.2	0.1667	0.1429

10. Employ inverse interpolation to determine the value of x that corresponds to $f(x) = 0.85$ for the following tabulated data:

x	0	1	2	3	4	5
y	0	0.5	0.8	0.9	0.941176	0.961538

Note that the values in the table were generated with the function $f(x) = x^3/(2 + x^3)$.

(a) Determine the correct value analytically.

(b) Use cubic interpolation of x versus y .

(c) Use inverse interpolation with quadratic interpolation and the quadratic formula.

(d) Use inverse interpolation with cubic interpolation and bisection. For parts (b) through (d) compute the true percent relative error.

Tema 6. Numerical Integration and Differentiation

1. Evaluate the following integral:

$$\int_{-2}^4 (1 - x - 4x^3 + 2x^5) dx$$

(a) analytically; (b) single application of the trapezoidal rule; (c) composite trapezoidal rule, with $n = 2$ and 4 ; (d) single application of Simpson's 1/3 rule; (e) Simpson's 3/8 rule; and (f) Boole's rule. For each of the numerical estimates (b) through (f) determine the percent relative error based on (a).

2. Integrate the following function analytically and using the trapezoidal rule, with $n = 1, 2, 3,$ and 4 :

$$\int_1^2 \left(x + \frac{2}{x}\right)^2 dx$$

Use the analytical solution to compute true percent relative errors to evaluate the accuracy of the trapezoidal approximations.

3. Integrate the following function both analytically and using Simpson's rules, with $n = 4$ and 5 . Discuss the results.

$$\int_{-3}^5 (4x - 3)^3 dx$$

4. Integrate the following function both analytically and numerically: Use both the trapezoidal and Simpson's 1/3 rules to numerically integrate the function. For both cases, use the multiple-application version, with $n = 4$. Compute percent relative errors for the numerical results.

$$\int_0^3 x^2 e^x dx$$

5. Use Romberg integration to evaluate

$$I = \int_1^2 \left(2x + \frac{3}{x}\right)^2 dx$$

to an accuracy of $e_s = 0.5\%$. Use the analytical solution of the integral to determine the percent relative error of the result obtained with Romberg integration. Check that e_t is less than the stopping criterion e_s .

6. Use order of h^8 Romberg integration to evaluate

$$\int_0^3 x e^x dx$$

Compare e_a and e_t .

7. Employ two- through six-point Gauss-Legendre formulas to solve

$$\int_{-3}^3 \frac{1}{1+x^2} dx$$

Interpret your results.

8. Compute forward and backward difference approximations of $O(h)$ and $O(h^2)$, and central difference approximations of $O(h^2)$ and $O(h^4)$ for the first derivative of $y = \cos x$ at $x = \pi/4$ using a value of $h = \pi/12$. Estimate the true percent relative error e_t for each approximation.

9. Use centered difference approximations to estimate the first and second derivatives of $y = e^x$ at $x = 2$ for $h = 0.1$. Employ both $O(h^2)$ and $O(h^4)$ formulas for your estimates.

10. Use Richardson extrapolation to estimate the first derivative of $y = \cos x$ at $x = \pi/4$ using step sizes of $h_1 = \pi/3$ and $h_2 = \pi/6$. Employ centered differences of $O(h^2)$ for the initial estimates.

11. Determine the first derivative of $y = 2x^4 - 6x^3 - 12x - 8$ at $x = 0$ based on the values at $x_0 = -0.5$, $x_1 = 1$ and $x_2 = 2$. Compare this result with the true value and with an estimate obtained using centered difference approximation based on $h = 1$.

12. Compute the first-order central difference approximations of $O(h^4)$ for each of the following functions at the specified location and for the specified step size:

(a) $y = x^3 + 4x - 15$ at $x = 0$, $h = 0.25$

(b) $y = x^2 \cos x$ at $x = 0.4$, $h = 0.1$

(c) $y = \tan(x/3)$ at $x = 3$, $h = 0.5$

(d) $y = \sin(0.5x^{0.5})/x$ at $x = 1$, $h = 0.2$

(e) $y = e^x + x$ at $x = 2$, $h = 0.2$

Compare your results with the analytical solutions.

4.3 Рейтинг-план дисциплины

Рейтинг-план дисциплины представлен в приложении 2.

5 Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

5.1 Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины

Основная литература:

1. Chapra S.C., Canale R.P. Numerical Methods for Engineers // McGraw-Hill Education, 2015. – Seventh edition – 970 pp.
2. Franklin J. Computational Methods for Physics // Cambridge University Press, 2013. – 400 pp.
3. Вержбицкий, В.М. Основы численных методов: учебник / В.М. Вержбицкий. – М.: Директ-Медиа, 2013. – 847 с. – ISBN 978-5-4458-3873-9; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=214564>
4. Вержбицкий, В.М. Численные методы математической физики: учебное пособие / В.М. Вержбицкий. – М.: Директ-Медиа, 2013. – 212 с. – ISBN 978-5-44583871-5; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=214562>
5. Поршневу, С.В. Компьютерное моделирование физических процессов в пакете MATLAB. + CD [Электронный ресурс]. – Электрон. дан. – СПб.: Лань, 2011. – 727 с. – Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=650

Дополнительная литература:

1. Klein A., Godunov A. Introductory Computational Physics // Cambridge University Press, 2013. – 137 pp.
2. Pang T. An Introduction to Computational Physics // Cambridge University Press, 2006. – 2nd ed. – 385 pp.
3. Usmanova Z., Nasibullin R. Educational practice on physics and mathematics: the methodical textbook for the foreign students // The Bashkir State Medical University; composers - Ufa, 2007
4. Амосов А.А., Дубинский Ю.А., Копченова Н.В. Вычислительные методы для инженеров: Учебное пособие. – М.: Высшая школа, 1994. – 544 с.
5. Бахвалов, Н.С. Численные методы [Электронный ресурс] / Н.С. Бахвалов, Н.П. Жидков, Г.М. Кобельков. – 7-е изд. (эл.). – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012. – 636 с. : ил. – (Классический университетский учебник)
6. Буйначев, С.К. Применение численных методов в математическом моделировании: учебное пособие / С.К. Буйначев. – Екатеринбург: Издательство Уральского университета, 2014. – 72 с. – ISBN 978-5-7996-1197-2; То же [Электронный ресурс]. – URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=275957>
7. Диков А.В., Степанова С.В. Математическое моделирование и численные методы: учебное пособие. – Пенза: Изд-во ПГПУ, 2000. – 162 с.
8. Ильина В.А., Силаев П.К. Численные методы для физиков-теоретиков. I. – Москва-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2003. – 132 с.
9. Ильина В.А., Силаев П.К. Численные методы для физиков-теоретиков. II. – Москва-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2004. – 118 с.
10. Калиткин Н.Н. Численные методы. – СПб.: БХВ-Петербург, 2011. – 592 с.

11. Киреев, В.И. Численные методы в примерах и задачах [Электронный ресурс]: учебное пособие / В.И. Киреев, А.В. Пантелеев. – Электрон. дан. – СПб.: Лань, 2015. – 448 с. – Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=65043
12. Мышкис А.Д. Элементы теории математических моделей. – М.: КомКнига, 2007. – 192 с.
13. Мэтьюз Д.Г., Финк К.Д. Численные методы. Использование MATLAB. – М.: Издательский дом «Вильямс», 2001. – 720 с.
14. Плохотников К.Э. Вычислительные методы. Теория и практика в среде MATLAB: курс лекций. – М.: Горячая линия Телеком, 2009. – 496 с.
15. Поршнева С.В. MATLAB 7. Основы работы и программирования. – М.: ООО «БиномПресс», 2011. – 320 с.
16. Поршнева С.В. Вычислительная математика. Курс лекций. – СПб.: БХВ-Петербург, 2004. – 320 с.
17. Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы. – М.: Наука, 1989. – 432 с.
18. Самарский А.А., Михайлов А.П. Математическое моделирование: Идеи. Методы. Примеры. – 2-е изд. – М.: Физматлит, 2005. – 320 с.
19. Сдвижков О.А. Математика на компьютере: MAPLE 8. – М.: СОЛОН-Пресс, 2003. – 176 с.
20. Срочко В.А. Численные методы: курс лекций. – Санкт-Петербург; Москва; Краснодар: Лань, 2010
21. Тарасевич Ю.Ю. Математическое и компьютерное моделирование. Вводный курс. – М.: УРСС, 2004. – 152 с.
22. Турчак, Л.И. Основы численных методов: учебное пособие / Л.И. Турчак, П.В. Плотников. – 2-е изд., перераб. и доп. – М.: Физматлит, 2002. – 304 с. – ISBN 5-9221-0153-6; То же [Электронный ресурс]. – URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=69329>
23. Тыртышников Е.Е. Методы численного анализа: учебное пособие. – М.: Академия, 2006. – 291 с.
24. Федоренко Р.П. Введение в вычислительную физику. – М.: Интеллект, 2008. – 504 с.
- Формалев, В.Ф. Численные методы / В.Ф. Формалев, Д.Л. Ревизников. – М.: Физматлит, 2006. – 399 с. – ISBN 5-9221-00479-9; То же [Электронный ресурс]. – URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=69333>

5.2 Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины

1. Электронно-библиотечная система «Электронный читальный зал»: <https://bashedu.bibliotech.ru/Account/LogOn>
2. Электронно-библиотечная система «Университетская библиотека online»: <http://www.biblioclub.ru/>
3. Электронно-библиотечная система издательства «Лань»: <http://e.lanbook.com/>
4. Электронно-библиотечная система «КнигаФонд»: <http://www.knigafund.ru/>
5. Учебно-методическая и профессиональная литература для студентов и преподавателей технических, естественно-научных и гуманитарных специальностей: <http://www.twirpx.com/>

6 Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

<i>Наименование специализированных аудиторий, кабинетов, лабораторий</i>	<i>Вид занятий</i>	<i>Наименование оборудования, программного обеспечения</i>
1	2	3
<p>Аудитория № 425 компьютерный класс (физмат корпус-учебное).</p>	<p>Лабораторные работы</p>	<p>Наименование оборудования Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, компьютер в составе: SOC -1150 Asus Intel Core i3-4150.4096 mb.1024 mb.64bit DDR3.монитор 23, клавиатура,мышь, кондиционер (сплит-система)Haier HSU-18HEK203/R2-HSU-18HUN03/R2, копировальный аппарат Canon FC-230, персональный компьютер в комплекте №1 KlamaS office, монитор DELL 21 - 8 шт., принтер HP Laser Jet 1220 лазерный A4 (принт+копир+сканер), принтер Samsung ML-1750 лазерный (A4, 16 стр/мин, 1200*600dpi, LPT/USB 2.0), проектор BenQ Projector PB7.210 (DIP,1024*768, D-sub, RCA, S-Video,Component, USB), системный блок компьютера Celeron 315-2.26/s478 EliteGroup P4M800-M/256Mb/80Gb/3.5"/CD-ROM/ATX, шкаф лабораторный ШЛ-06 МСК 900*500*1850 2-х створчатый верх-стекло,низ-металл</p> <p>Программное обеспечение 1. Windows 8 Russian. OLP NL OLP NL AcademicEdition. Договор №104 от 17.06.2013 г. Лицензии бессрочные.№104 от 17.06.2013 г. Лицензии бессрочные. 2. Windows Professional 8 Russian. OLP NL AcademicEdition. Договор №104 от 17.06.2013 г. Лицензии бессрочные. 3. Microsoft Office Standart 2013 Russian. OLP NL OLP NL AcademicEdition. Договор №114 от 12.11.2014 г. Лицензии бессрочные. 4. Права на использование Roxar software. Лицензия № RU 970297-A 5. Лицензионный договор № 100017/02314Д от 16.06.2017 г. Бессрочно.</p>
<p>Читальный зал №2, аудитория № 406 компьютерный класс (физмат корпус-учебное), система централизованного тестирования БашГУ</p>	<p>Самостоятельная работа</p>	<p>Наименование оборудования Читальный зал №2 Научный и учебный фонд, научная периодика, Wi-Fi доступ мобильных устройств, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 50</p> <p>Аудитория №406 Учебная мебель, доступ в интернет, Компьютер в составе: SOC -1150 Asus Intel Core i3-4150.4096 mb.1024 mb.64bit DDR3.монитор 23, клавиатура,мышь – 4 шт.; Кондиционер(сплит-система) Haier HSU-24HEK203/R2- HSU-24HUN03/R2 210136000003093, МФУ Kyocera V2030 DN 210134000003069; Персональный компьютер в комплекте № 1 iRU Corp – 6 шт.</p> <p>Программное обеспечение 1. Windows 8 Russian. OLP NL OLP NL AcademicEdition. Договор №104 от 17.06.2013 г. Лицензии бессрочные.№104 от 17.06.2013 г.</p>

		<p>Лицензии бессрочные.</p> <p>2. Windows Professional 8 Russian. OLP NL AcademicEdition. Договор №104 от 17.06.2013 г. Лицензии бессрочные.</p> <p>3. Microsoft Office Standart 2013 Russian. OLP NL OLP NL AcademicEdition. Договор №114 от 12.11.2014 г. Лицензии бессрочные.</p>
--	--	--

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

СОДЕРЖАНИЕ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ

дисциплины _____ Вычислительная физика _____ на 3 Семестр
(наименование дисциплины)

_____ очная _____
(форма обучения)

Вид работы	Объем дисциплины
Общая трудоемкость дисциплины (ЗЕТ / часов)	2/72
Учебных часов на контактную работу с преподавателем:	38,2
лекций	–
практических/ семинарских	–
лабораторных	36
других (групповая, индивидуальная консультация и иные виды учебной деятельности, предусматривающие работу обучающихся с преподавателем) (ФКР)	2 + 2,2
Учебных часов на самостоятельную работу обучающихся (СР)	31,8
Учебных часов на подготовку к экзамену/зачету/дифференцированному зачету (Контроль)	–

Форма(ы) контроля:

экзамен _____ – _____ семестр
зачет _____ 3 _____ семестр

№ п/п	Тема и содержание	Форма изучения материалов: лекции, практические занятия, семинарские занятия, лабораторные работы, самостоятельная работа и трудоемкость (в часах)				Основная и дополнительная литература, рекомендуемая студентам (номера из списка)	Задания по самостоятельной работе студентов	Форма текущего контроля успеваемости (коллоквиумы, контрольные работы, компьютерные тесты и т.п.)
		ЛК	ПР/СЕМ	ЛР	СР			
1	2	3	4	5	6	7	8	9
МОДУЛЬ 1								
1	Mathematical modeling and engineering problem solving. Approximations and round-off errors. Truncation errors	–	2	–	2	[1], стр. 11-108		
2	Roots of equations	–	4	–	3	[1], стр. 123-173		Письменные ответы на вопросы
3	Roots of polynomials	–	2	–	2	[1], стр. 176-201		Письменные ответы на вопросы
4	Linear algebraic equations 1: Gauss elimination	–	4	–	3	[1], стр.245-275		Письменные ответы на вопросы
5	Linear algebraic equations 2: Iterative methods	–	2	–	2	[1], стр. 300-316		Письменные ответы на вопросы
6	Linear algebraic equations 3: Special matrices	–	4	–	2	[1], стр. 300-316		Лабораторная работа №1
МОДУЛЬ 2								
7	Optimization	–	4	–	3	[1], стр. 355-413		
8	Curve fitting 1. Least-squares regression	–	2	–	2	[1], стр. 456-487		Письменные ответы на вопросы
9	Curve fitting 2. Interpolation	–	2	–	2	[1], стр. 490-524		Письменные ответы на вопросы

10	Curve fitting 3. Fourier approximation	–	2	–	2	[1], стр. 526-561		Письменные ответы на вопросы
11	Numerical Differentiation	–	4	–	3,4	[1], стр. 655-670		Письменные ответы на вопросы
12	Numerical Integration	–	4	–	3,4	[1], стр. 603-653		Лабораторная работа №2
	Всего часов:	–	36	–	31,8			

Рейтинг – план дисциплины

Вычислительная физика

(название дисциплины согласно рабочему учебному плану)

специальность _____ 03.03.01 Прикладные математика и физика _____

курс 2 , семестр 3

Виды учебной деятельности студентов	Балл за конкретное задание	Число заданий за семестр	Баллы	
			Минимальный	Максимальный
Модуль 1			0	50
Текущий контроль				
Аудиторная работа	5	1	0	5
Письменные ответы на вопросы	5	4	0	20
Рубежный контроль				
Лабораторная работа №1	25	1	0	25
Модуль 2			0	50
Текущий контроль				
Аудиторная работа	5	1	0	5
Письменные ответы на вопросы	5	4	0	20
Рубежный контроль				
Лабораторная работа №2	25	1	0	25
Поощрительные баллы			0	10
Участие в конференциях, публикация статей	1	10	0	10
Посещаемость (баллы вычитаются из общей суммы набранных баллов)				
Посещение практических / семинарских занятий			0	-10